UITWERKING TENTAMEN
STATISTISCHE EN THERMISCHE FYSICA 1
19 juni 2007

1) (Andere antwoorden zijn niet noodzakelijk incorrect)

(a) Er zijn twee goede antwoorden mogelijk: voor **onderscheidbare** deeltjes is het antwoord: M^N, voor **ononderscheidbare** deeltjes is het antwoord: $\frac{(M+N-1)!}{N!(M-1)!}$ (het laatste antwoord staat bv. op p.35 van Garrod en was onderwerp van Opgave 11 van het werkcollege).

(b) Een *(uniforme) intensieve observabele* is een observabele die niet met de systeemgrootte schaalt. Voorbeelden zijn: de dichtheid, temperatuur, druk, maar ook de energie per deeltje, het volume per deeltje etc.

(c) De grafiek moet laten zien dat $D(\omega)$ evenredig gaat met ω^2 voor $\omega \leq \omega_D$ en gelijk aan nul is boven de Debije-frequentie ω_D (grafiek hier niet getekend).

(d) De karakteristieke functie behorend bij een bepaald ensemble is maximaal in evenwicht. Uit de beschrijving volgt dat het hier om het groot-kanoniek ensemble gaat en dus is de *grand potential* ψ maximaal. Deze is gelijk aan βPV, dus is bij gegeven temperatuur en volume de *thermodynamische* grootheid de druk P maximaal in evenwicht (antwoorden PV of βPV zijn ook goed gerekend).

(e) Vanwege de op de Griekse letter labda (λ) gelijkende grafiek van de soortelijke warmte C als functie van de temperatuur T (zie bv. Garrod, Fig. 7.8(B) op p.183).

2) (a)

$$Z_N = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^{3N}x \int d^{3N}p \; e^{-\beta H(x,p)}$$

met $H(x,p)$ de Hamiltonfunctie voor het systeem van N deeltjes:

$$H(x,p) = \sum_{i=1}^{N} H_1(\vec{r}_i, \vec{p}_i)$$

Hierin staat (x,p) voor alle coördinaten en impulsen van de N deeltjes. h is de constante van Planck, $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$ is de *reciproke temperatuur*, k_B de constante van Boltzmann.

(b) Gebruik de formule voor **on**onderscheidbare deeltjes:

$$Z_N = \frac{1}{N!} Z_1^N$$

met

$$Z_1 = \frac{1}{h^3} \int d^3r \int d^3p \; e^{-\beta(p^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2)}$$

Via bekende Gaussische integralen volgt:

$$Z_1 = \frac{1}{h^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}\right)^{3/2} = \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^3}$$

zodat:

$$\boxed{Z_N = \tfrac{1}{N!}\tfrac{1}{(\beta\hbar\omega)^{3N}}}$$

(c) De kinetische energie K is:

$$K = \sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m}$$

Dan geldt (want alle deeltjes zijn equivalent):

$$\langle K\rangle = N\,\langle\frac{p^2}{2m}\rangle$$

Het gemiddelde is uit te rekenen m.b.v. de waarschijnlijkheidsverdeling die hoort bij de toestandssom voor 1 deeltje:

$$P(\vec{r},\vec{p}) = \frac{1}{Z_1 h^3}\,e^{-\beta(p^2/2m+\frac{1}{2}m\omega^2r^2)}\ ,$$

ofwel:

$$\frac{\langle K\rangle}{N} = \frac{1}{Z_1h^3}\int d^3r\int d^3p\,\left(\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}\right)e^{-\beta(p^2/2m+\frac{1}{2}m\omega^2r^2)}$$

De integraal over $d^3r = dxdydz$ is zoals onder (b), de integraal over $d^3p = dp_xdp_ydp_z$ volgt via:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dp_x\,p_x^2\,e^{-\gamma p_x^2} = -\frac{d}{d\gamma}\left(\int_{-\infty}^{\infty}dp_x\,e^{-\gamma p_x^2}\right) = -\frac{d}{d\gamma}\left(\sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\gamma^{\frac{3}{2}}}$$

De integraal over d^3p geeft dan $3/2m$ maal (voor de drie kwadratische termen op de bodem van de integraal) een product van twee factoren $\sqrt{2\pi m/\beta}$ (voor de integralen die niet afhangen van de p^2 op de bodem) en één factor $\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}$ (voor de integraal die wel afhangt van de p^2 op de bodem; zie hierboven). Met het resultaat voor Z_1 uit (b) vinden we dan:

$$\frac{\langle K\rangle}{N} = \frac{1}{h^3}(\beta\hbar\omega)^3\left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}\right)^{3/2}\frac{3}{2}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\frac{1}{\beta} = \frac{3}{2\beta}$$

ofwel:

$$\boxed{\langle K\rangle = \tfrac{3N}{2\beta} = \tfrac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T}$$

Voor $\langle V\rangle$ kan dezelfde berekening herhaald worden met $\vec{p}$ en $\vec{r}$ verwisseld, maar handiger is gebruik te maken van: $\langle E\rangle = \langle K\rangle + \langle V\rangle$ en $\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\log Z_N)$. Met het resultaat van (b) volgt snel: $\langle E\rangle = \frac{3N}{\beta} = 3Nk_{\mathrm{B}}T$ zodat:

$$\boxed{\langle V\rangle = \langle E\rangle - \langle K\rangle = \tfrac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T}$$

(d) Het *equipartitietheorema* zegt dat elke kwadratische term (in plaats- of impulscoördinaat) in de Hamiltoniaan een bijdrage $\frac{1}{2}k_{\rm B}T$ aan de gemiddelde energie levert (paragraaf 4.17 van Garrod). De Hamiltoniaan heeft $3N$ kwadraten van coördinaten en $3N$ kwadraten van impulscomponenten; daarom is de gemiddelde kinetische energie: $3N(\frac{1}{2}k_{\rm B}T) = \frac{3}{2}Nk_{\rm B}T$, de gemiddelde potentiële energie ook en de totale gemiddelde energie: $(3N + 3N)(\frac{1}{2}k_{\rm B}T) = 3Nk_{\rm B}T$.

(e) $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$. Kies deeltje 1 om dit uit te rekenen (welk deeltje je kiest maakt uiteraard niet uit):

$$\langle x_1\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1\, x_1\, e^{-\frac{1}{2}\beta m\omega^2 x_1^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1\, e^{-\frac{1}{2}\beta m\omega^2 x_1^2}} = 0$$

$$\langle x_1^2\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1\, x_1^2\, e^{-\frac{1}{2}\beta m\omega^2 x_1^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1\, e^{-\frac{1}{2}\beta m\omega^2 x_1^2}} = \frac{1}{\beta m\omega^2}$$

Voor de laatste berekening is gebruik te maken van de onder (c) berekende integraal. Alles bij elkaar nemend vinden we:

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{\beta m\omega^2} \qquad \Longrightarrow \qquad \Delta x = \frac{1}{\omega\sqrt{\beta m}} = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{k_{\rm B}T}{m}}$$

Inderdaad: hoe hoger de temperatuur T des te groter Δx (hetgeen te verwachten is: hoe hoger de beschikbare thermische energie, hoe groter de bereikbare uitwijking).

3) Dit is (een iets aangepaste vorm van) *Opgave 32* van werkcollege 8. Voor een uitgebreide uitwerking verwijs ik naar de uitwerking die je ongetwijfeld zelf gemaakt hebt n.a.v. het werkcollege. Ik volsta hier met enkele opmerkingen.

(a) Belangrijk is o.a. te zeggen dat $f_{\rm FD}(\varepsilon)$ (de Fermi-Dirac verdeling) de *gemiddelde bezettingsgraad* van de ééndeeltjestoestand met energie ε is.

(b) Een dergelijke berekening behoort tot je standaardbagage te horen; is enkele keren op zowel college als werkcollege voorbij gekomen. Het eindresultaat in dit geval is: $D(\varepsilon) = (2j + 1)mO/2\pi\hbar^2$; d.w.z. de toestandsdichtheid is onafhankelijk van ε en evenredig met het oppervlak O $(= L^2)$.

(c) De berekening bij (b) is eenvoudig uit te breiden naar willekeurige dimensie d; het antwoord is: $\gamma = \frac{d}{2} - 1$.

(d) Er zijn meerdere oplossingsmethoden; bijvoorbeeld: ga uit van de integraalformule voor ψ en de formule $\psi = \beta PV$. Partiëel integreren van de integraal voor ψ levert uiteindelijk $\beta\frac{d}{2}$ maal de gegeven integraalformule voor $\langle E\rangle$ op. QED.

(e) Dit loopt via het partiëel integreren van de gegeven formule voor $\langle N\rangle$ en het resultaat van (d); je vindt dan dat $\langle N\rangle = \beta PV - X$, waarbij X een integraal is die zeker positief is. Daarmee is het gevraagde dan bewezen.

4) (a) In termen van de t_i is de energie van een toestand:

$$\tilde{E} = -J\,(t_2 + t_3 + t_4 + \cdots + t_N)$$

De t_i nemen (net als de s_i) de waarden $+1$ en -1 aan.

(b) De inverse transformatie is:

$$s_1 = t_1 \qquad s_2 = t_2/t_1 = (t_2/t_1)\,t_1^2 = t_1 t_2$$

$$s_3 = t_3/s_2 = \frac{t_3}{t_1 t_2} = \ldots = t_1 t_2 t_3 \qquad \text{etc.}$$

$$s_N = t_1 t_2 t_3 \ldots t_N$$

We hebben gebruik gemaakt van het feit dat altijd geldt $t_i^2 = 1$ (zie onderdeel (a)). Uit de inverse transformatie blijkt meteen dat bij een gegeven set van waarden $\{t_i\}$ precies één set van waarden $\{s_i\}$ hoort. De originele (gegeven) transformatie liet al zien dat het omgekeerde ook geldt, daarom is er een 1-op-1 relatie tussen de $\{s_i\}$ en de $\{t_i\}$.

(c)

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E(\{s_i\})} = \sum_{\{t_i\}} e^{-\beta \tilde{E}(\{t_i\})} && (1)\\
&= \sum_{t_1=-1,1}\sum_{t_2=-1,1}\cdots\sum_{t_N=-1,1} e^{\beta J(t_2+t_3+\cdots t_N)} && (2)\\
&= 2\left(\sum_{t=-1,1} e^{\beta J t}\right)^{N-1} = 2\left(e^{\beta J} + e^{-\beta J}\right)^{N-1} && (3)\\
\Longrightarrow \quad & \boxed{Z_N = 2^N \cosh^{N-1}(\beta J)} && (4)
\end{aligned}$$

(d) Via de (te kennen) formules: $\langle E\rangle = -\partial\phi/\partial\beta$, $\phi = \log Z_N$ en $C = \partial\langle E\rangle/\partial T$ volgen door stug differentiëren de gevraagde resultaten:

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left[(N-1)\log(\cosh(\beta J))\right] = \ldots = -(N-1)J\tanh(\beta J)$$

$$C = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T} = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\beta}\frac{\partial\beta}{\partial T} = (N-1)J^2\left(-\frac{\sinh^2(\beta J)}{\cosh^2(\beta J)} + 1\right)\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T^2}$$

$$\Longrightarrow \quad \boxed{C = \tfrac{(N-1)J^2}{k_{\mathrm{B}}T^2}\tfrac{1}{\cosh^2(J/k_{\mathrm{B}}T)}}$$

(e) Zowel in de hoge-temperatuur limiet ($k_{\mathrm{B}}T \gg J$) als in de lage-temperatuur limiet ($k_{\mathrm{B}}T \ll J$) nadert C naar nul (als x^2 en $x^2\,e^{-2x}$ met $x = J/k_{\mathrm{B}}T$, respectievelijk). Verder is C een nette, differentiëerbare functie van T, dus er treedt geen fase-overgang op voor enige T.